

Βελτιστοποίηση

1) Ποιό είναι το πρόβλημα, πώς διατυπώνεται και τι αναμένουμε από την επίλυσή του.

2) Μέθοδοι βελτιστοποίησης. (Ελαχιστοποίησης)

3) Λογικά βελτιστοποίησης. (Ελαχιστοποίησης).

1. Έστω ότι μία συνάρτηση $f(x)$, $x \in S \subset \mathbb{R}^n$ είναι συνεχής και έχει πρώτες και δεύτερες παραγώγους συνεχείς.

Ζητείται να βρεθεί ένα σημείο $x^* \in S$ τέτοιο ώστε να ισχύει: $f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in S$

Το σημείο x^* αναφέρεται ολικό (ή καθολικό) ελάχιστο. Μία συνάρτηση μπορεί να έχει ένα ή περισσότερα καθολικά ελάχιστα ή και κανένα.

π.χ. $f(x) = x^2$ έχει ένα στο $x^* = 0$.

$f(x) = \sin x$ έχει άπειρα

$f(x) = -x^2$ δεν έχει ελάχιστο.

Ένα τοπικό ελάχιστο x_L^* ορίζεται ως:

$$f(x_L^*) \leq f(x) \quad \forall x: |x_L^* - x| < \varepsilon \rightarrow 0^+, (x \in S)$$

π.χ. $f(x) = (x^2 + 1) \sin^2 x$

$$f(x) = x^2 (1 + \sin^2 x)$$

2) Θα εξετάσουμε την περίπτωση των τοπικών
έλαχιστων.

α) Έλαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς:
Οπότε $S = \mathbb{R}^n, \Rightarrow x \in \mathbb{R}^n$

β) Έλαχιστοποίηση με περιορισμούς:
 $S \neq \mathbb{R}^n, S \subset \mathbb{R}^n, x \in S$

Οι περιορισμοί στις τιμές του x
μπορεί να διακρίνονται με τρεις
ίσως και τέσσερις.

π.χ. ($n=2$) $x_1 + x_2 = 1, x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$

$\min f(x)$ st: $x_1 + x_2 = 1, x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2$$

Έχει έλαχιστο στο σημείο: $x_1 = x_2 = \frac{1}{2}$

Μπορεί κανείς να το επιβεβαιώσει

χρησιμοποιώντας την ανισότητα Schwartz:

$$(x_1^2 + x_2^2)(a_1^2 + a_2^2) \geq (a_1 x_1 + a_2 x_2)^2$$

με $a_1 = a_2 = 1$, (Η ισότητα ισχύει για $\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2}$)
 $x_1^2 + x_2^2 \geq \frac{1}{2}$ (Αν $x_1 = x_2$)

Οι περιορισμοί σύμφωνα την πολυπλοκότητα και
παραβλεπόμενα.

Μέθοδοι έλαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς έχουν
αναπτυχθεί κυρίως γιατί είναι διαθεσιμότητα Η/Υ
ύψους ταχύτητας, πλέον παρά τις δεκαετίες
1950 και 1960.

Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης με περιορισμούς αμείχθηκαν
αρχικά στις μεθόδους χωρίς περιορισμούς και σαν συνέχεια
αναπτύχθηκαν αὐτοτελώς περαιτέρω.

Κατηγορίες μεθόδων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς

(ΒΧΠ) είναι βασικά τρεις

- Μέθοδοι που χρησιμοποιούν μόνο τιμές της συνάρτησης.
- τιμές της συνάρτησης και τις κλίσεις
- επιπλέον δεύτερες παραγώγους.

Μέθοδοι με περιορισμούς εμπίπτουν σε επιπλέον υποκατηγορίες, όπως.

Μέθοδοι (penalty) τιμωρίας; που ουσιαστικά αλλάζουν την αντικειμενική (υπό ελαχιστοποίηση) συνάρτηση

έτσι ώστε όταν οι ισχυροί περιορισμοί δεν ικανοποιούνται να αυξάνει η τιμή της, και χρησιμοποιούν και την νέα αυτή συνάρτηση μεθόδους ΒΧΠ.

Αντίστοιχα και ανισοτικούς περιορισμούς χρησιμοποιούν μέθοδοι φράγματος (Barrier) που αυξάνουν την τιμή της νέας αντικειμενικής συνάρτησης όταν οι ανισώσεις τείνουν να ικανοποιηθούν ως ισότητες.

Μια άλλη εμφανής κατηγορία μεθόδων βασίζεται στις πολλαπλασιαστές Lagrange και είναι η κατ'έξοχον κατηγορία που αναπτύχθηκε προβλεπόμενα με περιορισμούς κιόπως.

Υπάρχουν δε μέθοδοι που συνδυάζουν μέθοδοι penalty-barrier με μεθόδους Lagrange.
(Augmented Lagrangian μέθοδοι)

Έτσι οι περιορισμοί κατηγοριοποιούνται ως γραφτικοί και ως μη-γραφτικοί. Το προβάλημα με μη-γραφτικούς περιορισμούς είναι το πρόβλημα ποδύοδοκα.

Λογιστικό

Η βελτιστοποίηση χωρίς κέρδη άνδρες με την ανάπτυξη και την διαθεσιμότητα ισχυρών Η/Υ.

Τα περισσότερα προβλήματα βελτιστοποίησης δεν επιδέχονται αναλυτικές λύσεις.

Οι μέθοδοι είναι αριθμητικές αναγκαστικά.

Η ακρίβεια των λύσεων λοιπόν, περιορίζεται από την ακρίβεια της "μηχανής" και τα αριθμητικά σφάλματα.

Οι αριθμητικές μέθοδοι είναι συνήθως γρήγορες με λογιστικά.

Οι κατηγορίες λογιστικού έμπειρων σε δύο γενικές κατηγορίες:

α) Βιβλιοθήκες υποπρογραμμάτων βελτιστοποίησης

β) Ολοκληρωμένα περιβάλλοντα βελτιστοποίησης.

Οι βιβλιοθήκες είναι αρκετά εύκολες και ο χρήστης πρέπει να κάνει κώδικες σε παραλληλές υποπρογράμματα ή να δώσει τον προγράμματα και πιθανώς να συντάξει δύο (ή περισσότερες)

μεθόδους και να διαχειριστεί τα ένδιασμα αποτελέσματα ή δώσει τον κώδικα, το δε ολοκληρωμένα περιβάλλοντα απαιτούν μόνο την κωδικοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης και η ίδια διαχείριση είναι εμφανιστική χωρίς να χρειάζεται ο χρήστης να γράψει πολλούς κώδικες, είναι όπως διόξερο εύκολα.

Οι βιβλιοθήκες χρησιμοποιούνται όταν ο κύριος στόχος του προβλήματος δεν είναι η βελτιστοποίηση ή η βελτιστοποίηση εμφανίζεται ως ένα επιπλέον υποπροβλημα.

Αντίθετα τα ολοκληρωμένα περιβάλλοντα προορίζονται όταν ο κύριος στόχος είναι η βελτιστοποίηση ή η συνάρτηση.

Στο παρόν μάθημα θα χρησιμοποιήσουμε λογισμικό που ελπίζω να είναι κατηγορία των εδαφομετρήσεων περιβάλλοντος.

Το λογισμικό φέρει το όνομα MERLIN και έχει αναπτυχθεί από Παν/κιοι Ιωαννίνων.

Η συντήρηση και η περαιτέρω ανάπτυξη του συνεχίζεται και διαρκώς προκύπτουν νέες εκδόσεις.

Η ανάπτυξη έρχεται το 1984.

Το πακέτο λογισμικού MERLIN διατίθεται ελεύθερα από τον δικτυακό τόπο: <http://merlin.cs.uoi.gr>

Κατηγορίες προβλημάτων

Πέραν των γενικών προβλημάτων:

$$\min_x f(x) \quad x \in K$$

όπου f μία συνάρτηση συνεχής ή συνεχώς πριζες και δεύτερης παραγώγου,

υπάρχουν προβλήματα όπου η λύση της f επιτρέπει ειδική τεχνική που προσφέρει πλεονέκτημα.

Εάν π.χ. η $f(x) = \sum_{i=1}^M r_i^2(x)$ είναι δυνατό να θεωρηθεί τετραγώνων των συντεταγμένων $r_1(x), r_2(x), \dots$ τότε θα δοίτε ότι μπορεί να προσεγγιστεί τις δεύτερης παραγώγου με μέση των πρώτων παραγώγων, γεγονός που επιταχύνει την διαδικασία της βελτιστοποίησης.

Τα προβλήματα "ελάχιστων τετραγώνων"

προκύπτουν πολύ συχνά. Π.χ. το πρόβλημα

της προσομοίωσης δεδομένων ανάλογα σε πρόβλημα

ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης άθροισματος τετραγώνων

Για παράδειγμα είναι όη έχουν t, y δεδομένα
 Ζωμε δυνάδην $(t_1, y_1), (t_2, y_2), \dots, (t_m, y_m)$
 και θλδουκε να προσαφφίσουμε έαυτά ένα
 έναρζωιακό μονέλο $f(t, x)$ όπου $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$
 οι παράμετρα του μονέλου
 έλδυνταίκε δυνάδην να βρωίκε ζήές για ζή x
 ζήζωκε έαυέ:

i) $y_i \approx f(t_i, x) \quad \forall i = 1, 2, \dots, M$
 ii) έσοδύναφα

$$[y_i - f(t_i, x)]^2 \approx 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, M$$

iii)

$$\sum_{i=1}^M [y_i - f(t_i, x)]^2 \approx 0$$

Τό πρόβλημα ένα, λοιπόν έσοδύναφο
 έέ ζών έλαχιστοποίηση ές πρός $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$
 ζή έναρζωιας:

$$F(x) = \sum_{i=1}^M (y_i - f(t_i, x))^2$$

Εμφανίζατα όη $r_i(x) = y_i - f(t_i, x)$

() Άνδνι Περιορίεφνι.

Ευχρόζατα άπαρωίνζατα προβλήτατα ζή έορφή:

$$\min f(x) \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad x_i \in [a_i, b_i]$$

Οι περιορίεφνι έίωι δυνάδην: $a_i \leq x_i \leq b_i$
 ένοφίζατα περιορίεφνι όρων ζών έεαφρζωιας (bound)
 ii) περιορίεφνι κυτίου (Box constraints).

Απαιτούμενες γνώσεις

- 1) Ολοκληρωτικός και Διαφορικός Λογισμός
Ανάπτυξη Taylor σε μία και περισσότερες διαστάσεις
Ακολουθίες & Σειρές
- 2) Γραμμική Άλγεβρα
Μετρικές Διανυσμάτων & Πινάκων
Παραγοντοποίηση πινάκων LU, QR, Cholesky
Sherman-Morrison αντίστροφη
- 3) Γεωμετρία
Έξισωση εικόνας στον $\mathbb{R}^n$
Τετραγωνικές συναρτήσεις
Κλίση και Έξισωση εφαπτομένης
Τακυστική
- 4) Στοιχεία πιθανοτήτων.
- 5) Προγραμματισμός σε FORTRAN-77

Γενικές αρχές

Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης είναι επαναληπτικοί τύποι. Σε κάθε επανάληψη (k) υπάρχει μία εκτίμηση της λύσης x^* , έστω $x^{(k)}$, η οποία χρησιμοποιείται για να δημιουργηθεί μία νέα εκτίμηση $x^{(k+1)}$. Αρχικά λοιπόν πρέπει να υπάρχει μία εκτίμηση (έστω και όχι ιδιαίτερα ακριβής) $x^{(0)}$ για να μπορεί να δημιουργηθεί ο αλγόριθμος. Για συναρτήσεις με πολλή τοπικά ελάχιστα, διαφορετικές αρχικές εκτιμήσεις (αρχικά ευρεία) συνήθως οδηγούν σε διαφορετικές λύσεις. Η ακολουθία $x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(k)}, \dots$ που δημιουργείται από έναν αλγόριθμο βελτιστοποίησης συγκλίνει στο τοπικό ελάχιστο x^* , δηλαδή έχει ως ιδιότητα $x^{(k)} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} x^*$. Η ταχύτητα σύγκλισης είναι ένα σημαντικό χαρακτηριστικό του αλγορίθμου.